Piezo－electric－polaron Ⅱ
（有限温度の場合）

東大教養・基礎科学科　　岡　本　謙　一

（８月５日受理）

§1. 序

有限温度のピエゾポーラロン問題に於いて，最近 Porsch[1] は未知の方法ではあるが，グリーン関数を用いて中間結合理論から期待される結果を得た。我々は単純に Lee－Low－Pines の方法を有限温度に拡張することにより，Porsch と同一の結果を得た。これはオプティカルポーラロン問題で T. Yokota[2] が用いた方法を適用したものである。

§2. 有限温度のピエゾポーラロン

L－L－Pの結果[3] より２度カノニカル変換した後のハミルトニアンは次の形で与えられる。ここで運動量の単位として mv_s，エネルギーの単位として mv_s^2 を用いた。m は電子のバンド質量，v_s は平均化された音速である。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \tag{1}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_0 = &\frac{1}{2}(\mathbf{P} - \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q}\, b_{\mathbf{q}}^{+} b_{\mathbf{q}})^2 - \left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2}{q^{1/2}} f_q \\ &+ \sum_{\mathbf{q}} f_q^2 \left(q - \mathbf{P}\mathbf{q} + \frac{q^2}{2}\right) + \frac{1}{2}(\Sigma \mathbf{q} f_q^2)^2 \\ &+ \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^{+} b_{\mathbf{q}} \left(q + \mathbf{q} \sum_{\mathbf{q}'} \mathbf{q}' f_{q'}^2 \right) \\ &+ \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^{+} \left(q f_q - \mathbf{P}\cdot\mathbf{q} f_q + f_q \mathbf{q} \sum_{\mathbf{q}'} \mathbf{q}' f_{q'}^2 - \left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2} \frac{1}{q^{1/2}} \right. \\ &\left. + \frac{1}{2} q^2 f_q \right) + \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} \left(q f_q - \mathbf{P}\cdot\mathbf{q} f_q + f_q \mathbf{q} \sum_{\mathbf{q}'} \mathbf{q}' f_{q'}^2 \right. \\ &\left. - \left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2} \frac{1}{q^{1/2}} + \frac{1}{2} q^2 f_q \right)\end{aligned} \tag{2}$$

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \mathbf{q}\cdot\mathbf{q}'\, f_{q'} (b^+_{\mathbf{q}'} b^+_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} + b^+_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'})$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \mathbf{q}\cdot\mathbf{q}'\, f_q f_{q'} (b^+_{\mathbf{q}} b^+_{\mathbf{q}'} + b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} + 2 b^+_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}}) \qquad (3)$$

フォノン系の演算子 $b^+_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}$ の固有値を $N_{\mathbf{q}}$ とおく。上のハミルトニアンの対角部分のみを取る。対角部分を $E(\mathbf{P}\{N_{\mathbf{q}}\})$ と書けば，それは (4) で与えられる。ここで $f_{\mathbf{q}}$ は有限温度であるゆえ自由エネルギー F_P を極小とするように決める変分変数である。又 $\mathbf{P}$ は全運動量である。

$$E(\mathbf{P}, \{N_{\mathbf{q}}\}) = \frac{1}{2} (\mathbf{P} - \Sigma \mathbf{q} N_q)^2 - \left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2}{q^{1/2}} f_q$$

$$+ \sum_{\mathbf{q}} f_q^2 \left(q - \mathbf{P}\cdot\mathbf{q} + \frac{q^2}{2} \right) + \frac{1}{2} \left(\sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q}\, f_q^2 \right)^2$$

$$+ \sum_{\mathbf{q}} N_{\mathbf{q}} \left(q + \mathbf{q} \sum_{\mathbf{q}'} \mathbf{q}'\, f_{q'}^2 \right) + \Sigma\, f_q^2\, q^2\, N_q \qquad (4)$$

ここで T. Yokota と同様ポーラロンの運動量 $\mathbf{K}_P$ の一定のもののみを考える。つまり全運動量 $\mathbf{P}$ より free-phonon の運動量 $\Sigma\, N_q\, \mathbf{q}$ をさしひいた $\mathbf{K}_P = \mathbf{P} - \sum_{\mathbf{q}} N_q\, \mathbf{q}$ を fix して考える。

カノニカル分布の一般論より自由エネルギー F_P は (5) で与えられる。$Z_{\mathbf{P}}$ はカノニカルな状態和である。(6) の指数部分の肩に於いて，無次元化の形より $m v_s^2$ をかけてエネルギー単位にもどした。

$$F_{\mathbf{P}} = - K_B T \ln Z_{\mathbf{P}} \qquad (5)$$

$$Z_{\mathbf{P}} = \sum_{\mathbf{P}\{N_{\mathbf{q}}\}} \exp\left\{ - \frac{m v_s^2}{K_B T} E(\mathbf{P}, \{N_{\mathbf{q}}\}) \right\} \delta\left(\mathbf{P} - \sum_{\mathbf{q}} N_q \mathbf{q} - \mathbf{K}_{\mathbf{P}}\right) \qquad (6)$$

$Z_{\mathbf{P}}$ は (4) の $E(\mathbf{P}\{N_{\mathbf{q}}\})$ を用いて (7) のように変形される。

$$Z_{\mathbf{P}} = \exp\left\{ - \frac{m v_s^2}{K_B T} \left(\frac{1}{2} K_P^2 - \Sigma\, f_q^2\, \mathbf{q}\cdot\mathbf{K}_{\mathbf{P}} - \left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2}{q^{1/2}} f_q \right.\right.$$

$$\left.\left. + \frac{1}{2} \left(\sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q}\, f_q^2 \right)^2 + \sum_{\mathbf{q}} q\, f_q^2 + \sum_{\mathbf{q}} \frac{q^2}{2} f_q^2 \right) \right\}$$

$$\times \sum_{\{N_q\}} \exp\{-\frac{m v_s^2}{K_B T}\sum_{\mathbf{q}}(q+q^2 f_q^2) N_q\} \qquad (7)$$

$$\sum_{\{N_q\}} \exp\{-\frac{m v_s^2}{K_B T}\sum_{\mathbf{q}}(q+q^2 f_q^2) N_q\}$$

$$= \prod_{\mathbf{q}} \left[\frac{\exp\{\frac{m v_s^2}{K_B T}(q+q^2 f_q^2)\}}{\exp\{\frac{m v_s^2}{K_B T}(q+q^2 f_q^2)\}-1} \right]$$

であるゆえ，自由エネルギーは次の（8）で与えられる。

$$F_{\mathbf{p}} = m v_s^2 \Big(\frac{K_P^2}{2} - \sum f_{\mathbf{q}}^2 \mathbf{q}\cdot\mathbf{K_p} - (\frac{4\pi\alpha}{V})^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2}{q^{1/2}} f_q +$$

$$\frac{1}{2}(\sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} f_q^2)^2 - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}} q^2 f_q^2 + \sum q(f_q^2-1)\Big) +$$

$$K_B T \sum_{\mathbf{q}} \ell n\,(\exp\{\frac{m v_s^2}{K_B T}(q+q^2 f_q^2)-1\}-1) \qquad (8)$$

$\partial F_{\mathbf{p}}/\partial f_q = 0$ の条件より f_q を決めると，（9）で与えられる。（9）式中の $\overline{N_q}$ ，η は（10），（11）で与えられる。

$$f_q = \frac{(\frac{4\pi\alpha}{V})^{1/2} \frac{1}{q^{1/2}}}{(\eta-1)\mathbf{K}_P\cdot\mathbf{q}+q+\frac{q^2}{2}(2\overline{N_{\mathbf{q}}}+1)} \qquad (9)$$

$$\overline{N_q} = \frac{1}{\exp\{\frac{m v_s^2}{K_B T}(q+q^2 f_q^2)\}-1} \qquad (10)$$

$$\eta K_P^2 = \sum_{\mathbf{q}} (\frac{4\pi\alpha}{V}) \frac{1}{q} \frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{K}_P}{\{(\eta-1)\mathbf{K}_p\cdot\mathbf{q}+q+\frac{q^2}{2}(2\overline{N_q}+1)\}^2} \qquad (11)$$

$\overline{N_q}$ は電子が１個あるため，格子振動の振動数がふえる効果をあらわしているが，f_q^2 は $\frac{1}{V}$ のオーダーであるゆえ無視され，$\overline{N_q}$ は通常のプランク分布と考えてよい。

$E_p = F_p - T\frac{\partial F_p}{\partial T}$ よりフォノン系のエネルギーを無視して E_p は次の式で与えられる。

$$E'_p = E_p / m v_s^2$$

$$= \frac{1}{2}(1-\eta^2)K_P^2 - \left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)\sum_{\mathbf{q}}\frac{1}{q}\frac{1}{q+\frac{q^2}{2}(2\overline{N_q}+1)+(\eta-1)\mathbf{K_p}\,\mathbf{q}} \tag{12}$$

（11），（12）は無次元化の形で Porsch と一致する。

$\overline{N_q} \sim \frac{\gamma}{q}$，$\gamma = \frac{K_B T}{m v_s^2}$ としてフォノンの分布関数に高温近似を用いると（ピエゾの時には $m v_s^2 \simeq 0.1\,°K$ ゆえヘリウム温度でも許される）（11），（12）は K_p の小さい領域において（11）′，（12）′ と変形される。

$$\eta(1-\eta)^2 = \frac{\alpha}{\pi K_P^3}\Big[(q_m+2\gamma+2)\,\ell n\left|\frac{q_m+2\gamma+2-2(1-\eta)K_P}{q_m+2\gamma+2+2(1-\eta)K_P}\right|$$

$$-(2\gamma+2)\,\ell n\left|\frac{2\gamma+2-2(1-\eta)K_P}{2\gamma+2+2(1-\eta)K_P}\right|\Big] \tag{11'}$$

$$E_P' = \frac{1}{2}(1-\eta^2)K_P^2 - \frac{\alpha}{\pi}\frac{1}{K_P(1-\eta)}\Big[(q_m+2\gamma+2)\times$$

$$\ell n\left|\frac{q_m+2\gamma+2+2(1-\eta)K_P}{q_m+2\gamma+2-2(1-\eta)K_P}\right| - 2(\gamma+1)\,\ell n\left|\frac{\gamma+1+(1-\eta)K_P}{\gamma+1-(1-\eta)K_P}\right|$$

$$+\ 2(1-\eta)K_P\,\ell n\left|\frac{(q_m+2\gamma+2)^2-4(1-\eta)^2K_P^2}{(2\gamma+2)^2-4(1-\eta)^2K_P^2}\right|\Big] \tag{12'}$$

（12）′を K_P の２次まで展開して，十分小さな K_P に対して polaron mass を求めると（13），（14）で与えられる。

$$E_P'(K_P) = -\frac{4\alpha}{\pi}\ell n \left| \frac{q_m+2+2\gamma}{2+2\gamma} \right| + \frac{K_P^2}{2m^*} \tag{13}$$

$$m^* = m\left[1+\frac{4\alpha}{3\pi}\left\{\frac{1}{(1+\gamma)^2} - \frac{1}{(1+\gamma+q_m/2)^2}\right\}\right] \tag{14}$$

polaron mass の band mass よりのずれは，（14）の形から小さいことがわかる。我々は（11）′，（12）′を数値的に解いて，この有限温度の分散関係を Osaka[4] の結果と比較しようとしている。

reference

1） Phys. Letters Vol 30A No7 (1969)

2） T. Yokota 物性論研究 69号 (1953)

3） G. Whitfield et al, Phys. Rev. 165 (1968) 993

K. Okamoto thesis unpublished (1970)

4） Y. Osaka J.P.S.J. 19 (1964) 2346